対角化可能行列の特異値と条件数との関係

下村顕士

2023 年 4 月 17 日

対角化可能行列 $\mathsf{H} \in \mathrm{Mat}_{n\times n}(\mathbb{C})$ を, $\mathsf{V} \in GL(n,\mathbb{C})$ を用いて

$$\mathsf{H} = \mathsf{V}\Lambda\mathsf{V}^{-1}, \quad \Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) \tag{1}$$

とスペクトル分解する. ただし, $\lambda_i \in \mathbb{C}$ $(i = 1, 2, \dots, n)$ は H の固有値. 以下, ノルム $\|\mathsf{V}\|_*$ に対応する条件数を $\kappa_*(\mathsf{V}) \coloneqq \|\mathsf{V}\|_* \left\|\mathsf{V}^{-1}\right\|_*$ と置く.

H の特異値を $(0 \le) s_1 \le s_2 \le \cdots \le s_n$ と置く. このとき, Frobenius ノルム

$$\mathsf{A} \in \mathrm{Mat}_{n\times n}(\mathbb{C}) \mapsto \|\mathsf{A}\|_{\mathrm{F}} \coloneqq \sqrt{\mathrm{Tr}[\mathsf{A}\mathsf{A}^\dagger]} \in \mathbb{R}_{\ge 0} \tag{2}$$

の劣乗法性[*1] から,

$$\sum_{i=1}^{n} s_i^2 = \mathrm{Tr}[\mathsf{H}\mathsf{H}^\dagger] = \|\mathsf{H}\|_{\mathrm{F}}^2 = \left\|\mathsf{V}\Lambda\mathsf{V}^{-1}\right\|_{\mathrm{F}}^2 \le \left(\|\mathsf{V}\|_{\mathrm{F}} \|\Lambda\|_{\mathrm{F}} \left\|\mathsf{V}^{-1}\right\|_{\mathrm{F}}\right)^2 = \left(\sum_{i=1}^{n} |\lambda_i|^2\right) \kappa_{\mathrm{F}}(\mathsf{V})^2 \tag{4}$$

が成り立つ. よって,

$$\mathrm{dep}_{\mathrm{F}}(\mathsf{H}) \coloneqq \sqrt{\sum_{i=1}^{n} s_i^2 - \sum_{i=1}^{n} |\lambda_i|^2} \le \sqrt{\sum_{i=1}^{n} |\lambda_i|^2}\sqrt{\kappa_{\mathrm{F}}(\mathsf{V})^2 - 1}, \tag{5}$$

$$\kappa_{\mathrm{F}}(\mathsf{V}) \ge \sqrt{1 + \left(\sum_{i=1}^{n} |\lambda_i|^2\right)^{-1} \mathrm{dep}_{\mathrm{F}}(\mathsf{H})}. \tag{6}$$

また, Frobenius ノルムと 2-ノルム

$$\mathsf{A} \in \mathrm{Mat}_{n\times n}(\mathbb{C}) \mapsto \|\mathsf{A}\|_2 \coloneqq s_n \in \mathbb{R}_{\ge 0} \tag{7}$$

との間には

$$\|\mathsf{A}\mathsf{B}\|_{\mathrm{F}} \le \|\mathsf{A}\|_{\mathrm{F}} \|\mathsf{B}\|_2 \quad (\mathsf{A}, \mathsf{B} \in \mathrm{Mat}_{n\times n}(\mathbb{C})) \tag{8}$$

[*1] 実際, Cauchy-Schwarz の不等式より

$$\|\mathsf{A}\mathsf{B}\|_{\mathrm{F}}^2 = \sum_{i,j=1}^{n} |(\mathsf{A}\mathsf{B})_{i,j}|^2 = \sum_{i,j=1}^{n} \left|\sum_{k=1}^{n} (\mathsf{A}^\dagger)^*_{k,i}(\mathsf{B})_{k,j}\right|^2 \le \sum_{i,j=1}^{n} \left(\sum_{k=1}^{n} \left|(\mathsf{A}^\dagger)_{k,i}\right|^2\right)\left(\sum_{l=1}^{n} \left|(\mathsf{B})_{l,j}\right|^2\right) = \|\mathsf{A}\|_{\mathrm{F}}^2 \|\mathsf{B}\|_{\mathrm{F}}^2. \tag{3}$$

の関係がある[*2] から,

$$\sum_{i=1}^{n} s_i^2 = \left\|\mathsf{V}\mathsf{\Lambda}\mathsf{V}^{-1}\right\|_{\mathrm{F}}^2 \leq \|\mathsf{V}\mathsf{\Lambda}\|_{\mathrm{F}}^2 \left\|\mathsf{V}^{-1}\right\|_2^2 = \|\mathsf{\Lambda}\mathsf{V}\|_{\mathrm{F}} \left\|\mathsf{V}^{-1}\right\|_2^2 \leq \|\mathsf{\Lambda}\|_{\mathrm{F}}^2 \|\mathsf{V}\|_2^2 \left\|\mathsf{V}^{-1}\right\|_2^2 = \left(\sum_{i=1}^{n} |\lambda_i|^2\right) \kappa_2(\mathsf{V})^2. \tag{11}$$

よって,

$$\mathrm{dep}_{\mathrm{F}}\,(\mathsf{H}) \leq \sqrt{\sum_{i=1}^{n} |\lambda_i|^2} \sqrt{\kappa_2(\mathsf{V})^2 - 1}, \tag{12}$$

$$\kappa_2(\mathsf{V}) \geq \sqrt{1 + \left(\sum_{i=1}^{n} |\lambda_i|^2\right)^{-1} \mathrm{dep}_{\mathrm{F}}\,(\mathsf{H})} \tag{13}$$

も成り立つ.

[*2] 実際, エルミート行列 $\mathsf{B}\mathsf{B}^\dagger$ をユニタリ行列 U で

$$\mathsf{B}\mathsf{B}^\dagger = \mathsf{U}\,\mathrm{diag}(s_1^2, s_2^2, \ldots, s_n^2)\mathsf{U}^{-1} \tag{9}$$

のように対角化すると,

$$\begin{aligned} \|\mathsf{A}\mathsf{B}\|_{\mathrm{F}}^2 &= \mathrm{Tr}[\mathsf{A}\mathsf{B}\mathsf{B}^\dagger\mathsf{A}^\dagger] = \mathrm{Tr}[\mathsf{B}\mathsf{B}^\dagger\mathsf{A}^\dagger\mathsf{A}] = \mathrm{Tr}[\mathsf{U}\,\mathrm{diag}(s_1^2, s_2^2, \ldots, s_n^2)\mathsf{U}^{-1}\mathsf{A}^\dagger\mathsf{A}] = \mathrm{Tr}[\mathrm{diag}(s_1^2, s_2^2, \ldots, s_n^2)\mathsf{U}^{-1}\mathsf{A}^\dagger\mathsf{A}\mathsf{U}] \\ &= \sum_{i=1}^{n} s_i^2 (\mathsf{U}^{-1}\mathsf{A}^\dagger\mathsf{A}\mathsf{U})_{i,i} \leq s_n^2 \sum_{i=1}^{n} (\mathsf{U}^{-1}\mathsf{A}^\dagger\mathsf{A}\mathsf{U})_{i,i} = \|\mathsf{B}\|_2^2\,\mathrm{Tr}[\mathsf{U}^{-1}\mathsf{A}^\dagger\mathsf{A}\mathsf{U}] = \|\mathsf{B}\|_2^2\,\mathrm{Tr}[\mathsf{A}\mathsf{A}^\dagger] = \|\mathsf{A}\|_{\mathrm{F}}^2 \|\mathsf{B}\|_2^2 \end{aligned} \tag{10}$$

を得る.